

Tóth Petra, Czakó Gábor

A $\text{Cl} + \text{CH}_3\text{CN}$ reakció potenciálenergia-felülete és rezgési módspecifikus reakciódinamikája

A klóratom és az acetonitril (CH_3CN) reakciója kiváló modellrendszer a többatomos reakciók mechanizmusának és dinamikájának tanulmányozására, különösen olyan esetekben, amikor több versengő reakcióút és bonyolult energiaátadási folyamat játszik szerepet. Kutatásunk célja egy nagy pontosságú, teljes dimenziós potenciálenergia-felület (PES) létrehozása és a reakció dinamikájának részletes feltárása volt. Ehhez kiterjedt *ab initio* számításokat végeztünk a lehetséges reakciócsatornák (hidrogén-absztrakció, hidrogén-, metil- és cianid-szubsztitúció) jellemzésére, majd a kapott adatok alapján analitikus PES-t fejlesztettünk, amelyen kvázi-klasszikus trajektória szimulációkat hajtottunk végre különböző ütközési energiák, impakt paraméter értékek alkalmazásával. A dinamikai vizsgálatok során elemeztük a reakciómechanizmusok energiatartalmát, a szórás- és támadási szögeloszlásokat és az energiamegoszlás jellemzőit is a keletkező termékek között. Emellett rezgési módspecifikus szimulációkat is végeztünk, amelyek során a reagáló CH_3CN molekula különböző kezdeti rezgési gerjesztéseinek hatását vizsgáltuk az energiaátadásra, a reakcióhatékonyságra és a dinamikai tulajdonságokra. Eredményeink részletes képet adnak a reakció dinamikai tulajdonságairól, és hozzájárulnak a komplex reakciódinamikai mechanizmusok mélyebb elméleti megértéséhez.

Török Péter

LiCl átalakítása LiOH-dá trikalcium-alumináttal

Az elmúlt évtizedben a lítium-hidroxid-monohidrát ($\text{LiOH} \cdot \text{H}_2\text{O}$) prekursorként egyre nagyobb szerepet játszik a lítiumion-akkumulátorok, ezen belül az ún. NMC-katódok előállításában. A LiOH előállításának egyik legfontosabb kiindulási anyaga a felszíni és felszín alatti vizekben található LiCl, ami a világ teljes lítiumkészletének kb. kétharmadát teszi ki. A jelenlegi szintézismódszer a Li_2CO_3 lecsapásán és $\text{Ca}(\text{OH})_2$ -dal történő hidroxiddá alakításán alapszik. Mivel az utolsó lépés tömény szuszpenziók esetén ($> 10 \text{ g L}^{-1} \text{ Li}^+$) alacsony konverzióval megy végbe, fontos kutatási irányvá vált a LiOH Li_2CO_3 köztitermék kihagyásával történő szintézise. E célból munkánk során a LiCl, CaO és trikalcium-aluminát ($\text{Ca}_3\text{Al}_2\text{O}_6$) reakcióját vizsgáltuk, mely során egy lépésben LiOH képződik, kloridion-tartalmú réteges kettős hidroxid (Friedel-só) $[\text{Ca}_2(\text{Al}(\text{OH})_6)]_2\text{Cl}_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ kiválása mellett.

A reakciók kivitelezése során a kiindulási Li^+ koncentráció 5 g L^{-1} és 10 g L^{-1}

volt, a hőmérséklet 5–75 °C között változott, míg a $\text{LiCl}:\text{CaO}:\text{Ca}_3\text{Al}_2\text{O}_6$ molaránya 2:1:1 volt. A reakcióidő 1 órától 1 hétre való növelése során megfigyeltük, hogy a konverzió 51%-ról 66%-ra (5 g L⁻¹), illetve 57%-ról 74%-ra (10 g L⁻¹) nőtt. A konverzió időbeli változása mindkét esetben telítési jelleget mutatott, ami alapján a vizsgált reakció egyensúlyi. 2 óra reakcióidő után a hőmérséklet változtatásával a konverziók alakulása az alábbi (10 g L⁻¹): 40% (5 °C), 65% (25 °C), 66% (50 °C) és 57% (75 °C). A szilárd anyagok porröntgen-diffraktometriás vizsgálata kimutatta, hogy a reakció során keletkező fő termék a Friedel-só, míg kisebb mennyiségben megjelentek az el nem reagált $\text{Ca}(\text{OH})_2$ -ra jellemző diffrakciós csúcsok is.

Összességében elmondható, hogy a töményebb LiCl-oldatok átalakíthatók LiOH-dá egy lépésben elfogadható konverzióval, szobahőmérsékleten. További terveink közé tartozik alacsonyabb, illetve magasabb kiindulási Li⁺ koncentráció alkalmazása mellett a Mg²⁺ ionok hatásának vizsgálata is, ami gyakran csökkenti a leválasztásos módszerek hatékonyságát.

Trixler Bettina, Pusztafalvi Henriette

Autista gyermeket nevelő családok élethelyzete és támogatási szükségletei Magyarországon

Az autizmus spektrumzavar nemcsak az érintett gyermekek, hanem egész családjuk életminőségét is befolyásolja. A Magyarországon élő, bevándorló háttérű családok sérülékeny csoportot alkotnak, mivel a nyelvi és kulturális akadályok fokozhatják a társadalmi kirekesztettség és az információhoz való korlátozott hozzáférés kockázatát.

Kutatásunk célja az autista gyermeket nevelő, Magyarországon élő, angol nyelvet beszélő családok pszichoszociális helyzetének feltérképezése, különös tekintettel a szülői stresszre, megküzdésre és jóllétre, valamint az ezekre ható tényezőkre.

A vizsgálat kvantitatív, kérdőíves adatgyűjtésen alapul, amelyet hólabda-mintavételi technikával végzünk, validált angol nyelvű mérőeszközök felhasználásával. A szülői változók mellett adatokat gyűjtünk a 4-10 év közötti gyermek állapotáról és atipikus viselkedéseikről is.

Feltételezzük, hogy a gyermek tünetei és viselkedéses jellemzői szignifikáns összefüggést mutatnak a szülők pszichés jóllétével, és hogy a nyelvi-kulturális akadályok tovább növelik a szülői stresszt, összevetve az eredményeket hasonló kutatásokkal. A vizsgálat hozzájárulhat a bevándorló háttérű családok támogatási szükségleteinek jobb megértéséhez, és alapot adhat a társadalmilag igazságosabb, befogadóbb szakpolitikai intézkedésekhez az oktatási, egészségügyi és szociális szférában.